

## POVZETEK

Podana je primerna in učinkovita metoda za regioselektivno uvedbo halogenskih atomov v metilensko skupino 1,3-diketonskega dela molekule ali aktiviran obroč 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-diona z uporabo N-X reagentov kot najobetavnejših za elektrofilno halogeniranje. Kompleksacija diketonskega dela molekule z uvedbo BF<sub>2</sub> skupine vodi do regioselektivnega halogeniranja mesta 2 ali 2,6 aktivirane fenilne skupine, kar je odvisno od molskega razmerja substrat/reagent. Uvedba halogenskega atoma na α mesto 1,3-diketonskega dela molekule 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-diona popolnoma spremeni konformacijo, ki je sedaj 1,3-diketon v primerjavi z izhodno spojino, ki se nahaja v keto-enolni obliki. Strukture izhodne spojine in halogeno derivatov so bile določene z rentgensko analizo v trdnem stanju in s spektroskopskimi metodami v raztopini. Narejeni so bili tudi DFT izračuni.

Novo fluorescenčno barvilo, BF<sub>2</sub> derivat 1-fenil-3-(3,5-dimetoksifenil)-propan-1,3-diona obstaja v dveh polimorfni oblikah z različnimi fotofizikalnimi lastnostmi; zeleno-rumene emitirajoče prizme in rumeno fluorescenčne ploščice, kar je pogojeno z načinom kristalizacije. Kristalni strukturi se razlikujeta po medsebojni orientaciji metoksi skupin v fenilnem obroču, ki sta anti in sin-anti. Vzorec oborine A (anti konformera) kaže številne kromne efekte, ki vključujejo mehano-, termo- in kronokromizem kakor tudi efekt pretvorbe amorfne faze v stabilnejšo kristalinično fazo A povezan s kristalizacijsko-induciranim povečanjem emisije (CIEE). Fluorescenca v trdnem se ponavljajoče spreminja tako v barvi kot v učinkovitosti ter kaže odlično reverzibilnost pod vplivom zunanjih stimulansov. Vzorec oborine B (sin-anti konformera) se termično pretvori iz sin-anti v stabilnejšo anti obliko. Barvilo kaže tudi solvatokromni efekt (SE), agregacijsko-inducirano emisijo (AIE) in preko sublimacije tankih nanosov nastanek ploščatih mikrostruktur in mikrovlaknen, ki kažejo efekt optičnega valovoda.

Sintetiziranih je bilo tudi vseh šest izomerov dimetoksi kurkuminoidov. Konformacije v trdnem stanju so bile določene z rentgensko kristalografijo ter <sup>1</sup>H MAS in <sup>13</sup>C CPMAS NMR meritvami v trdnem stanju, ki kažejo odvisnost od mesta vezanih metoksi skupin. V raztopini so dimetoksi kurkuminoidi prisotni v konformacijah, ki jih lahko opišemo z obstojem dveh ekvivalentnih tautomer v hitrem ravnotežju. Mesto vezanih metoksi skupin pa le malo vpliva na intramolekularno enolno vodikovo vez. Teoretični izračuni kažejo, da je energijska razlika HOMO LUMO odvisna od pozicije metoksi skupin. Kloriranje in bromiranje α mesta 1,3-diketonskega dela molekule ne spremeni preferenčne oblike, ki je tako kot pri izhodnih spojinah cis keto-enol.

Fotostabilnost kurkuminoidov je močno odvisna od pozicij metoksi skupin, pri čemer so razpolovni časi med 10 min za 3,5-diOCH<sub>3</sub> in 199 min za 2,5-diOCH<sub>3</sub>. Vse spojine, še posebno BF<sub>2</sub> derivati kurkuminoidov, ki so bili sintetizirani, kažejo zelo zanimive fotokromne lastnosti in nekateri tudi AIE, solvatokromni in mehanokromni efekt.